



TITLE:

4. Dynamics of Interface

AUTHOR(S):

太田, 隆夫

CITATION:

太田, 隆夫. 4. Dynamics of Interface. 物性研究 1983, 40(1): 112-115

ISSUE DATE:

1983-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90885>

RIGHT:

太田隆夫

- 2) P. B. Wiegmann: Phys. Lett. **80A** (1980) 163.
- 3) N. Kawakami and A. Okiji: Phys. Lett. **86A** (1981) 483.
- 4) A. Okiji and N. Kawakami: Solid State Commun. **43** (1982) 365.
P. B. Wiegmann et al.: JETP Lett. **35** (1982) 92.
- 5) K. Yamada: Prog. Theor. Phys. **53** (1975) 970.
- 6) K. Yosida and A. Yoshimori: Magnetism. Vol. **5**, p. 253.
- 7) P. B. Wiegmann: J. Phys. C. **14** (1981) 1463.
N. Andrei: Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 397.
- 8) A. Okiji and N. Kawakami: to be published.
- 9) Krishna-murthy et al.: Phys. Rev. **B21** (1980) 1003.
- 10) V. T. Rajan et al.: Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 497.
H. U. Desgranges and K. D. Shotte: Phys. Lett. **91A** (1982) 240.

Dynamics of Interface

九大・理 太 田 隆 夫

熱力学的に平衡な系を相転移温度以下に急冷すると系は熱力学的に不安定あるいは準安定となり、揺ぎの増大を経て最終のより安定な平衡状態に落ちつく。このような現象はスピノダル分解あるいは Nucleation として古くから知られている。動的 Ising モデルに基づいたスピノダル分解（以下、保存系とよぶ）の最近の計算機実験は秩序化の過程にスケーリング則が成立することを示している。^{1), 2)} 揺ぎの時間発展は構造関数 $I_k(t) = \langle |S_k(t)|^2 \rangle$ で記述される。ここに、 $S_k(t)$ は局所的秩序変数 $S(\mathbf{r}, t)$ の Fourier 成分である。計算機実験によると、関数 $\hat{I}_k(t) = I_k(t) / \int_k I_k(t)$ が、波数 k が揺ぎの相関距離の逆数より十分小さな領域で、次のスケーリング則に従う。

$$\hat{I}_k(t) = k(t)^{-d} F(k/k(t)) \quad (1)$$

ここに、 d は空間の次元である。(1) は臨界点近傍の二成分溶液の実験^{3), 4)} や、秩序変数が保存しない秩序無秩序転移（以下、非保存系とよぶ）の計算機実験^{5), 6)} でも観測されている。 $k(t)$ は $k(t) \sim t^{-a}$ とあらわされ、指数 a は急冷してからの時間 t が十分大きい領域で

$$a \simeq \begin{cases} 1/3 & (\text{保存系}) \\ 1/2 & (\text{非保存系}) \\ 1 & (\text{二成分溶液}) \end{cases} \quad (2)$$

の数値をもつ。ただし、合金のスピンodal分解の実験では $a = 1/3$ は得られていない。⁷⁾

このような不安定な系の秩序化のプロセスで出現するスケーリング則をどう理解するか。急冷直後の初期段階では (critical quench の場合) percolation でみられるようなこみ入ったクラスターがたくさんでき、それが時間とともに成長し、最終的になめらかな domain になるものと思われる。そこで、我々は二相を分ける界面の運動に注目する。すなわち、スケーリング則 (1), (2) が成立するところでは、秩序変数の揺ぎのうち界面の運動に付随するものが (1) の時間変化に relevant であろう。界面の厚さが無限少の極限では、臨界溶液のモード結合理論でよく知られた方程式から出発して界面の従がう運動方程式を導出できる。⁸⁾ この方程式は特殊な場合として保存系、非保存系を含んでおり、次元解析から次のような特性振動数 (relaxation rate) Ω_q をもつことが示せる。⁹⁾

$$\Omega_q \propto \begin{cases} q^3 & (\text{保存系}) \\ q^2 & (\text{非保存系}) \\ q & (\text{二成分溶液}) \end{cases} \quad (3)$$

ここに、 q は界面の変化を特徴づける $d-1$ 次元波数ベクトルの大きさ。(3) は実験事実 (2) と consistent である。

スケーリング関数 $F(x)$ を計算することは一般の場合には成功していないが、非保存系では次のように近似的に求めることができる。非保存系のダイナミクスは TDGL (time-dependent Ginzburg-Landau) 方程式

$$\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L(-\nabla^2 S - \tau S + \frac{g}{6} S^3) + f(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

で記述される。ここに、 L, τ, g は正の定数、 f はランダム力、

$$\langle f(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}', t') \rangle = 2L \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$$

τ, g 無限大 (τ/g 有限) の極限で (4) から界面の運動方程式

$$v(a, t) = LK(a, t) \quad (5)$$

太田隆夫

を得る。^{10), 11), 12)}ここに, $K(a, t)$ は界面上 a の位置での全曲率。 $v(a, t)$ は K を正とする方向に向いた界面の速度の法線成分の大きさ。(5)ではランダム力及び界面間の相互作用を無視した。 $u(\mathbf{r}, t) = 0$ が界面の配位を与えるような補助場 $u(\mathbf{r}, t)$ を導入すると, (5)は $u(\mathbf{r}, t)$ に対する拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{L(d-1)}{d} \nabla^2 u \quad (6)$$

と近似的に同等であることが示せる。¹³⁾ただし, そのとき $u(\mathbf{r}, t)$ と $S(\mathbf{r}, t)$ は次の関係にある。
$$\langle S(\mathbf{r}, t) S(\mathbf{r}', t') \rangle = \frac{2}{\pi} \arcsin \left(\frac{\langle u(\mathbf{r}, t) u(\mathbf{r}', t') \rangle}{\langle u^2 \rangle} \right) \quad (7)$$

ここで $u(\mathbf{r}, t)$ の初期分布として Gauss 型

$$P\{u(\mathbf{r}, 0)\} \propto \exp \left[-\frac{c}{2} \int d\mathbf{r} u(\mathbf{r}, 0)^2 \right] \quad (8)$$

を仮定した。(これは正当化できる。) c は定数。(7)からわかるように(4)式から(6)式への変換は一種の非線型変換である。(7)から構造関数を計算するのは容易であり, 確かにスケーリング則(1)を満たし, $F(x)$ は計算機実験と非常によい一致を示す。¹³⁾なお, $S(\mathbf{r}, t)$ に対する(6), (7)の表式は Kawasaki 達による TDGL 方程式(4)の一見異なる解析からも得られている。¹⁴⁾

以上の研究は川崎恭治先生と協同でなされたものであり, 非保存系のスケーリング関数の計算には Pittsburgh 大学 David Jasnow も含まれている。

界面が平らな場合には(5)で無視した界面間の相互作用が重要である。このときのダイナミックスについてはこの研究会の Kawasaki の報告を参照されたい。

参考文献

- 1) P. S. Sahni and J. D. Gunton, Phys. Rev. Letters **45** 369 (1980).
- 2) J. L. Lebowitz, J. Marro and M. H. Kalos, Acta Metall. **30** 297 (1982).
- 3) Y. C. Chou and W. I. Goldberg, Phys. Rev. **A23** 858 (1981).
- 4) C. M. Knobler and N. C. Wong, J. Phys. Chem. **85** 1972 (1981).
- 5) M. K. Phani, J. L. Lebowitz, M. H. Kalos and O. Penrose, Phys. Rev. Letters **45** 366 (1980).
- 6) P. S. Sahni, G. Dee, J. D. Gunton, M. Phani, J. L. Lebowitz and M. H. Kalos, Phys. Rev. **B24** 410 (1981).
- 7) M. Hennion, D. Ronzand and P. Guyot, Acta Metall. **30** 599 (1982).
- 8) K. Kawasaki and T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **68** 129 (1982).

- 9) K. Kawasaki and T. Ohta, Proceedings of a Conference on Nonlinear Fluid Behavior, Boulder, June (1982) (Physica A, to be published).
- 10) S. M. Allen and J. W. Cahn, Acta Metall. **27** 1085 (1979).
- 11) K. Kawasaki and T. Ohta, Prog. Theor. Phys. **67** 147 (1982).
- 12) R. Bausch, V. Dohm, H. K. Janssen and R. K. P. Zia, Phys. Rev. Letters, **47** 1837 (1981).
- 13) T. Ohta, D. Jasnow and K. Kawasaki, Phys. Rev. Letters, **49** 1223 (1982).
- 14) K. Kawasaki, M. C. Yalabik and J. D. Gunton, Phys. Rev. **B17** 455 (1978).

コ メ ン ト

九大・理 川 崎 恭 治

太田氏の報告の末尾にかかれている一次元的な系でのキンク集団の Kinetics について話した。内容は「集団生物学」研究会で話したものと同内容で、そちらの方の私の研究会報告を見ていただきたい。

結 晶 成 長 の 理 論

名大・工 本 間 重 雄

§1 序

結晶成長の機構は次の二種に大別出来る。¹⁾

(1) 沿面成長 (lateral growth);

この場合、結晶は常に一層ずつ成長し、従って、界面は滑らかである。気相からの固相の成長がこの場合にあたる。

(2) 付着成長 (adhesive growth);

界面が何層にもわたっており、境界面が定かではない。これは液体の固化過程に多くみられる。液相、中間相、固相から系が形成されている。

以下では (2) の機構について議論する。前述した様に、この場合、系は三相より成ると考えて良いから、各相を統一的に記述するパラメーターが必要となる。このために、Temkin によって導入された格子模型を援用し、これを基にして、議論を展開させる。

次節では、Temkin による格子模型を述べ、この自由エネルギーの表式を求める。§3 では、前節で求めた自由エネルギーの表現を連続体化し、固液平衡状態での界面の様子を求め